

Etude numérique de l'effet de taille sur un écoulement 3D autour d'une sphère rigide suspendue dans un fluide newtonien

J. Bikard, P. Menard, T. Budtova et E. Peuvrel-Disdier

*Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Centre de Mise en Forme des Matériaux,
UMR CNRS 7635, BP 207, 06904 Sophia-Antipolis France*

Résumé: L'écoulement autour d'une particule sphérique rigide suspendue dans un fluide newtonien soumis à un cisaillement simple est numériquement étudié en utilisant le code éléments finis Rem3D[®]. Le mouvement de la sphère est imposé par un contact collant avec le fluide. L'effet de la taille de la particule par rapport à celle de la cellule de cisaillement a été étudié. Les calculs directs prouvent que la modélisation 3D est nécessaire pour prévoir correctement le comportement de la sphère. La proximité de la particule et des parois affecte fortement les vitesses, les lignes de courant et le mouvement de la sphère (augmentation de la période de rotation) et le champ de contrainte (changement d'angle d'orientation et d'augmentation des efforts locaux maximaux).

Mots clés: Contraintes hydrodynamiques, Suspension, Effet de taille, 3D, Eléments finis, Approche multidomaines

1. Introduction

La compréhension et la prévision du comportement d'objets (particules rigides, agglomérats, gouttes liquides, particules ou capsules de gel ...) en suspension dans une matrice fluide et soumis à un écoulement exigent une bonne connaissance des champs mécaniques (vitesse, efforts hydrodynamiques) autour de cet objet. Le comportement d'objets de base (sphères) dans une matrice newtonienne infinie est bien décrit par les solutions analytiques dans le cas du cisaillement pur [1-3]. Cependant, cette analyse ne tient pas compte des dimensions finies de la cellule autour de l'objet, ni de leurs conséquences sur le comportement de sphère. Des écoulements plus complexes (par exemple, avec plusieurs sphères) ont été considérés analytiquement, d'abord par [4] et plus complètement par [5]. Mais l'effet de la taille sur l'écoulement n'a pas été explicitement pris en considération dans leurs analyses. Dans les deux cas, les auteurs ont montré que les lignes de courant sont influencées par la taille de la sphère et la période de rotation diffère de celle obtenue par Jeffery. Récemment, [6] a utilisé une simulation numérique 3D afin de calculer l'effet de la proximité des parois sur la période de rotation d'une sphère, en imposant un couple constamment nul à la sphère. Aucun résultat sur les champs d'effort ou de contrainte n'a cependant été donné. L'objectif de ce travail est d'employer une méthode éléments finis pour résoudre l'équation du mouvement pour une sphère rigide, suspendue dans une matrice newtonienne et soumise à un cisaillement simple, et d'étudier l'effet de la proximité des parois sur le comportement de la sphère. Le logiciel Rem3D[®], développé au CEMEF,

est employé pour calculer l'écoulement et les efforts hydrodynamiques autour de la sphère. Une approche de type multidomaines et une condition de contact collant à l'interface sphère/matrice ont été considérées.

Les équations variationnelles du problème et la méthode numérique sont tout d'abord décrites. Les résultats directs de la simulation tridimensionnelle de l'écoulement autour de la sphère (impact de l'effet de taille sur les lignes de courant, efforts hydrodynamiques et période de rotation) sont ensuite présentés et comparés à ceux connus de la littérature.

2. Formulation multidomaines

Le logiciel Rem3D[®], initialement dédié à la simulation de l'injection des polymères [7], est employé pour calculer l'écoulement et les efforts hydrodynamiques autour d'une sphère rigide. Un cisaillement est imposé au fluide par deux parois en déplacement dans des directions opposées (Fig. 1). La cellule numérique de cisaillement ainsi composée est considérée comme domaine multiphasé comprenant la sphère et le fluide newtonien.

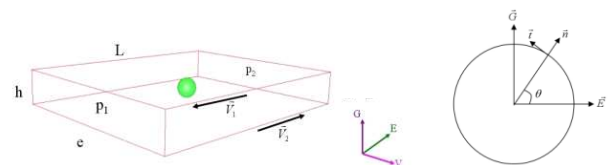


Fig. 1: présentation schématique de la cellule de cisaillement Ω et de la particule avec la surface liquide/solide \mathcal{S} . Le trièdre (E, G, V) correspond au référentiel global, alors que (n, t, V) correspond au référentiel local sur la surface.

La sphère rigide est approchée par une "gouttelette" sphérique de fluide newtonien de viscosité η_{part} ($2,5 \cdot 10^5$ Pa.s), beaucoup plus grande que celle de matrice η_f ($2,2 \cdot 10^2$ Pa.s). Cette différence d'ordre de grandeur assure un comportement de corps rigide à la sphère. Le contact entre le fluide et la sphère (décrits par la surface Σ) est parfaitement collant. Les dimensions du volume numérique de contrôle Ω sont $L \times h \times e$, où L est sa longueur, e la largeur et h la distance entre la paroi supérieure et le plan inférieur. On suppose que e et L sont égales et que h est beaucoup plus petit que L . Pour des raisons de symétrie, la sphère est située au centre du volume Ω . Les conditions limites sur le bord $\partial\Omega$ sont données par $p_1 = p_2 = p_0$ sur $\partial\Omega_p$ et $v_1 = -v_2$ sur $\partial\Omega_v$ (Fig. 1). Afin de déterminer la position de l'interface Σ , la fonction caractéristique C_f de la sphère est définie comme nouveau champ matériel dans Ω par :

$$C_f(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \text{ est dans le fluide} \\ 0 & \text{si } x \text{ est dans la sphère} \end{cases} \quad (1)$$

où x représente le vecteur des coordonnées cartésiennes d'un point matériel contenu dans Ω

Les équations de Stokes écrites dans chaque phase (sphère, fluide) peuvent être globalement exprimées dans Ω par le biais de C_f sous une forme variationnelle par [8] :

$$\begin{cases} \int_{\Omega} 2[C_f \eta_f + (1 - C_f) \eta_{mc}] \varepsilon(v) : \varepsilon(v^*) d\Omega - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(v^*) d\Omega - \int_{\partial\Omega} p_0 v^* \cdot n ds = \\ \int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(v) d\Omega = 0 \\ \int_{\Omega} \varphi^* \left[\frac{\partial C_f}{\partial t} + v \cdot \operatorname{grad}(C_f) \right] d\Omega = 0 \end{cases} \quad (2)$$

où v et p sont respectivement la vitesse et la pression. (v^*, p^*, φ^*) sont des fonctions tests choisies dans des espaces de Sobolev adaptés [7]. La première équation du système (2) exprime l'équilibre mécanique quasi-statique, la seconde, l'incompressibilité des fluides et la troisième, la convection de la fonction caractéristique. Avec cette formulation, l'interface Σ correspond mathématiquement à la surface de la discontinuité de la fonction caractéristique C_f à travers les éléments du maillage:

$$\Sigma = \{x \in \Omega / \operatorname{grad}(C_f(x)) = \delta_x n\} \quad (3)$$

où δ_x est la distribution de Dirach en x . L'utilisation d'un maillage anisotrope et d'algorithmes de maillages adaptatifs est essentielle pour une localisation précise de l'interface sphère/fluide (maillage raffiné autour de Σ). Cette technique permet de réduire au minimum l'erreur numérique commise sur l'équation (3).

Le système (2) est résolu par une méthode éléments finis mixte vitesse/pression, de type Galerkin discontinue [7]. Le choix d'un maillage non structuré avec des éléments tétraédriques P1+/P1 (stabilisation de la bulle) assure la stabilité numérique de la méthode (respect du critère de Ladyzhenskaya, de Babuska et de Brezzi [9]). L'adaptation de maillage est basée sur des algorithmes adaptatifs anisotropes, développés dans le logiciel GCM[®] [10] associé à Rem3D[®].

3. Résultats

Les dimensions suivantes sont retenues pour le volume de calcul : $e = L = 20$ mm, $h = 0,1$ mm. La vitesse des parois est égale à $0,25$ mm.s⁻¹, menant à un taux macroscopique de cisaillement de 5 s⁻¹. La dimension de la sphère (de diamètre d) est ramenée à la taille de l'entrefer h via le ratio r défini par :

$$r = \frac{d}{h} \quad (4)$$

3.1. Champ de vitesse et lignes de courants

La Figure 2 montre les champs de vitesse autour de la sphère dans le plan (E, G) qui contient l'équateur de la sphère pour plusieurs ratios r . Les résultats montrent une zone de recirculation de largeur $l(x)$, accompagnée d'un fort cisaillement. Les lignes de courant qui traversent cette zone font demi-tour avant d'atteindre la sphère et le sens de l'écoulement local (à proximité de la sphère) devient opposé à celui de l'écoulement principal. Cette zone correspond à une zone d'effort de cisaillement élevé, donc de forte dissipation visqueuse. La présence d'une singularité du même type a été également prévue par [5].

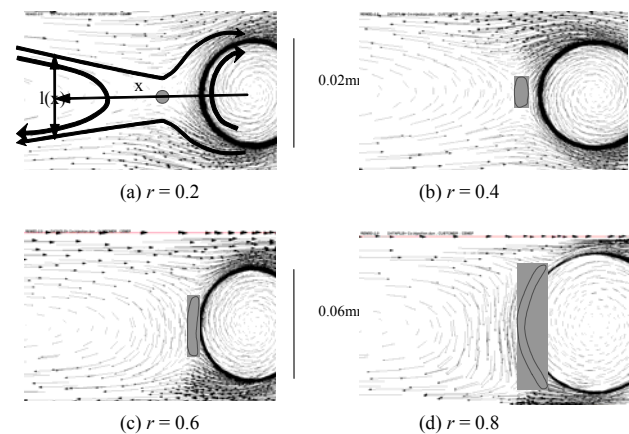


Fig. 2 : écoulement calculé autour de la sphère dans le plan (E, G) et position de la zone de fort taux de cisaillement pour différentes valeurs du ratio r .

Les effets du ratio r sur les dimensions de la zone de recirculation sont présentés dans les Figures 2(a-d), respectivement pour $r = 0,2, 0,4, 0,6$ et $0,8$: plus r

est grand, plus la zone de recirculation est grande. De plus, cette zone de recirculation se rapproche de la sphère avec l'augmentation de r . Elle peut être corrélée à l'augmentation de l'effort normal et à la diminution de l'effort tangentiel (cf. § 3.2). Un comportement semblable a été également prévu par [5] dans leur solution analytique. Cette zone de taux de cisaillement élevé à proximité de la sphère affecte également la valeur de l'angle pour lequel l'effort normal est maximal, d'autant plus que la dimension de la sphère devient comparable à l'entrefer.

L'effet de la troisième dimension (le long de l'axe V) sur les champs de vitesse est montré sur la Figure 3 : un exemple de six coupes dans des plans (E, G) traversant la sphère à différentes distances de son centre (à $V = 0$ (plan équatorial), $d/4$, $d/2$, d (tangentiel sur la surface de sphère), $2d$ et $4d$) est montré pour le cas $r = 0,6$. La Figure 3a est équivalente à la Figure 2c, mais représentée en 3D. La Figure 3b montre que la zone de recirculation n'est pas confinée dans le plan équatorial mais a également une épaisseur dans la troisième dimension V . Cela est confirmé par la Figure 3c qui montre une déflexion des lignes de courant autour de la sphère (avec des boucles dans la direction V). Les lignes de courant ne demeurent donc pas planes mais gauchissent dans la troisième dimension.

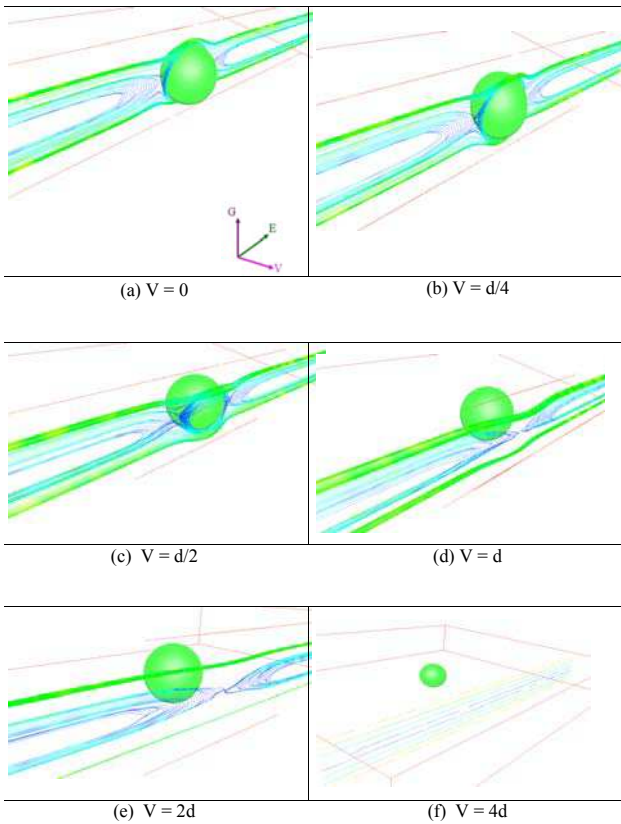


Fig. 3: lignes de courant 3D dans le plan équatorial (E, G) autour de la sphère pour différents plans de coupe parallèles.

Les Figures 3a-c montrent qu'il y a une deuxième zone de recirculation autour de la sphère (lignes de courant fermées). Ces lignes de courant existent seulement à proximité de la sphère (Figs. 3d-e) et pourraient correspondre à un décollement de couche limite autour de la sphère. À $V = 2d$, seule la zone de recirculation principale existe, et l'effet de gauchissement est moins prononcé. À $V > 3-4d$, les lignes de courant ne sont plus sensibles à la présence de la sphère et sont redevenues parallèles (Fig. 3f). La Figure 3 montre clairement l'importance de la modélisation 3D : l'observation d'une deuxième zone de recirculation et le gauchissement des lignes de courant ne pourraient pas être obtenus par des calculs 2D, parce que les champs de vitesse et d'efforts y sont trop contraints [8].

3.2. Champ de contraintes autour de la sphère

Les résultats concernant le champ de contraintes autour de la sphère sont présentés dans la Figure 4. Pour les efforts normaux et tangentiels, une solution analytique est connue pour une sphère dans un milieu infini. Dans ce cas-ci, les valeurs sont données par les équations de Brenner [3]. L'effort normal maximal théorique est obtenu pour un angle θ (défini Fig. 1) égal à 45° (courbe 1 Fig. 4a). Pour une viscosité de 200 Pa.s et un taux de cisaillement de 5 s^{-1} , la valeur de l'effort normal théorique maximal est égale à la $2,51 \cdot 10^3 \text{ Pa}$.

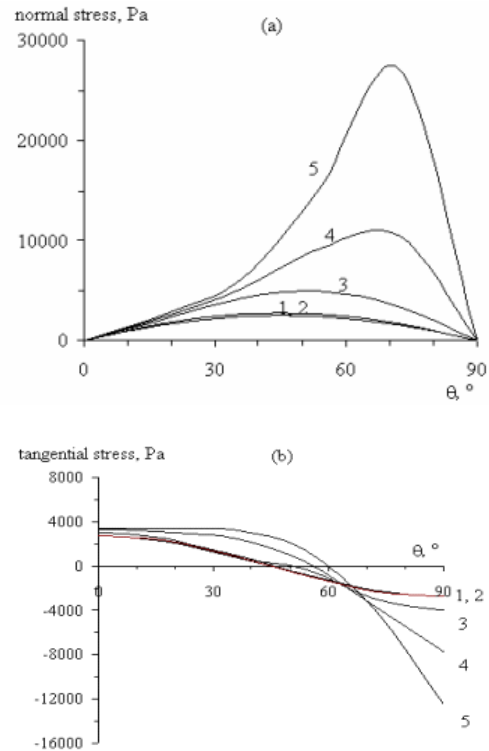


Fig. 4: contraintes normale (a) et tangentielle (b) en fonction de l'angle θ en milieu infini (1) et plusieurs valeurs du ratio $r = 0.2$ (2), 0.6 (3), 0.8 (4) et 0.9 (5).

Deux cas sont clairement à distinguer:

$r \leq 0,2$:

- l'effort normal maximal obtenu pour $r = 0,2$ est à $\theta = 45,03^\circ$ (Fig. 4a), ce qui correspond à la prévision de la théorie de Brenner. La différence entre les valeurs calculées et théoriques de θ est de moins de 0,1 %. La valeur de l'effort normal maximal calculé est de 2803 Pa (différence de 1 % avec la valeur obtenue par l'intermédiaire des équations de Brenner). Dans ce cas, l'influence des parois est donc négligeable et le milieu peut être considéré comme quasi-infini.

- l'effort tangentiel nul pour $r = 0,2$ est obtenu à $\theta = 45,02^\circ$ (Fig. 4b). La différence entre les valeurs calculées et théoriques est également inférieure à 0,1.

$r > 0,2$:

- les résultats obtenus par simulation ne vérifient plus la prévision analytique obtenue dans un milieu infini [4]. L'angle θ pour lequel l'effort normal est maximal est déplacé de 45° à des valeurs plus élevées, croissantes avec r (courbes 3-5, Fig. 4a) et les courbes deviennent asymétriques (l'angle se déplace vers la paroi la plus proche). La valeur maximale de l'effort normal augmente également. Par exemple, avec une variation de r de 0,4 à 0,9, l'effort normal maximal évolue de 3000 à environ 30000 Pa, ce qui correspond à une forte surpression sur le contour de la sphère.

- la valeur de θ pour laquelle l'effort tangentiel est égal à zéro est également décalée de 45° à 65° (courbes 3-5, Fig. 4b). En d'autres termes, pour r entre 0,4 et 0,9, l'angle pour lequel l'effort tangentiel est nul se décale également près des parois et la valeur de l'effort augmente de 2500 à environ 13000 Pa. Les courbes d'efforts tangentiels deviennent asymétriques de la même manière que celles des efforts normaux.

3.3. Période de rotation de la sphère

La Figure 5 compare les résultats obtenus avec Rem3D[®] à un autre résultat numérique issu de la littérature [6]. La condition de contact collant utilisée dans Rem3D[®] n'a pas été formulée, mais les auteurs imposent un couple appliqué à la sphère constamment nul.

Les résultats des deux simulations numériques coïncident avec la période de Jeffery [1] pour $r < 0,2$. La condition de contact collant prévoit une décélération de rotation de la sphère à mesure que le diamètre de la sphère relativement au rapport de taille d'espace augmente. Ce résultat est en contradiction avec la simulation basée sur le couple nul [6]. Dans le modèle présenté, la décélération est

cependant expliquée par la présence des zones de forts taux de cisaillement, correspondant à une zone de dissipation forte d'énergie mécanique comme identifiée sur la Figure 2(a-d). Cette dissipation, augmentant avec r , est corrélée à une réduction de l'énergie mécanique dans l'écoulement au voisinage de la sphère (donc d'énergie cinétique), ce qui a pour résultat la décélération de la sphère (augmentation de sa période de rotation). Il convient de noter que quand le diamètre de la sphère est égal à l'entrefer ($r = 1$), le contact collant entre la sphère et les parois impose directement la rotation de la sphère (période

$T = 2\pi / \dot{\gamma}$), numériquement non calculée en raison de problèmes de convergence quand r tend vers 1, même en raffinant le maillage (couplage fluide/structure trop contraignant). Cependant, ce cas limite impose une transition forte dans la période de rotation calculée pour r compris entre 0,9 et 1.

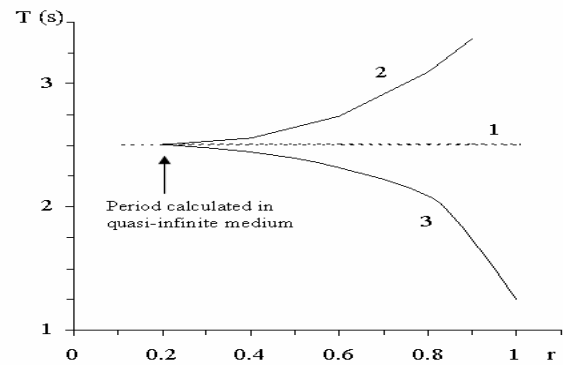


Fig. 5: période de rotation en fonction de r : référence à Jeffery (1), calcul Rem3D[®] (2) et approche du "couple nul" [8] (3).

En employant une méthode de moindre carrés, la dépendance de la période de rotation T à r pour des valeurs de r comprises dans l'intervalle $[0-0,9]$ a été déterminée comme suit :

$$T(r) = T_{\text{Jeffery}} (1 - 2,212 r + 0,642 r^2) \quad (5)$$

Le choix d'une approximation quadratique a été fait pour des raisons de simplicité et les coefficients de l'équation (5) ont été estimés pour un taux fixe de cisaillement de $5s^{-1}$. Cette formule a, de plus, été numériquement validée pour un fluide newtonien cisailé à des taux macroscopiques compris entre 0,5 et $10s^{-1}$.

4. Conclusion

Le comportement d'une sphère en suspension dans un fluide newtonien et soumise à un cisaillement simple a été simulé en 3D en utilisant le logiciel Rem3D[®]. Les résultats concernent l'effet de la taille de la sphère sur les champs de vitesse, la distribution d'effort autour d'elle, les lignes de courant et la période de la rotation. L'écoulement calculé avec

Rem3D[®] a montré une bonne concordance avec les prévisions analytiques de [5] (cas d'un cisaillement complexe produit par la proximité d'autres objets). Cependant, les résultats obtenus sont en désaccord avec la période de rotation de la sphère calculée par [6] : les deux simulations diffèrent dans leur hypothèse pour imposer le mouvement de la sphère. L'évolution de la période calculée avec Rem3D[®] a cependant été corrélée avec les champs de contrainte de vitesse et la dissipation mécanique dans l'écoulement.

5. Références

- [1] Jeffery, G.B. The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid, *Proc. R. Soc. London, Ser A*, 102, 161-179 (1922).
- [2] Bagster, D.F., Tomi, D. The stresses within a sphere in simple flow fields, *Chem. Eng. Sci.*, 29, 1773-1783 (1974).
- [3] Brenner, H. The Stokes resistance of an arbitrary particle III. Shear fields, *Chem. Eng. Sci.*, 19, 631-651 (1964).
- [4] Bartok, W., Mason, S.G. Particle motions in sheared suspensions. VII Internal circulation in fluid droplets (theoretical), *J. Coll. Sci.*, 13, 293-307 (1958).
- [5] Kao, S.W., Cox, R.G., Mason, S.G. Streamlines around single spheres and trajectories of pairs of spheres in two dimensional creeping flows, *Chem. Eng. Sci.*, 32, 1505-1515 (1977).
- [6] Pomchaitaward, C., Manas-Zloczower, I., Feke, D.L. Investigation of the dispersion of carbon-black agglomerates of various sizes in simple shear flows, *Chem. Eng. Sci.*, 58, 1859-1865 (2003).
- [7] Pichelin, E., Coupez, T. Finite element solution of the 3D mold filling problem for viscous incompressible fluid, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 163, 359-371 (1998).
- [8] Bikard, J. Ménard, P., Peuvrel-Disdier, E., Budtova, 3D numerical simulation of the behaviour of a spherical particle suspended in a Newtonian fluid and submitted to a simple shear, *J. Comp. Mat. Sci.*, submitted
- [9] P. Lesaint, P.A. Raviart, *Mathematical aspects of finite elements in partial differential equations*. (Academic Press, 1974).
- [10] Gruau, C., Coupez, T. 3D tetrahedral, unstructured and anisotropic mesh generation with adaptation to natural and multidomain metric, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, in press (2005).